

TIF101 Tillämpad kvantfysik

LÖSNIGNAR

Datum: 10 januari 2022
Tid: 8.30 – 12.30
Examinator: Anders Hellman, telefon: 031-7725611
Hjälpmedel: Physics Handbook, Beta Mathematics Handbook, Chalmersgodkänd miniräknare.
Betygsgränser : Betyg 3: 17 p, betyg 4: 25 p, betyg 5: 37 p (inkluderat poäng från inlämningsuppgifter).
Tentamen maximalt 24 p.

1. Zeemaneffekten (4 poäng)

Hamiltonianen för en enelektronatom i ett magnetfält om man försummar spinn är

$$H = \frac{e}{2m_e} \hat{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{B}.$$

Antag att magnetfältet har styrka 2 T i z -led. Beräkna energiskillnaden (i eV) mellan tillstånden med $m_\ell = 0$ och $m_\ell = 1$.

$$\begin{aligned} \Delta E &= |\langle m_\ell = 1 | H | m_\ell = 1 \rangle - \langle m_\ell = 0 | H | m_\ell = 0 \rangle| \\ H &= \frac{e}{2m_e} B_z \hat{L}_z. \\ \hat{L}_z |m_\ell\rangle &= \hbar m_\ell \implies \langle m_\ell = 1 | \hat{L}_z | m_\ell = 1 \rangle = \hbar, \quad \langle m_\ell = 0 | \hat{L}_z | m_\ell = 0 \rangle = 0. \\ \implies \Delta E &= \frac{\hbar e}{2m_e} B_z. \end{aligned}$$

Physics handbook: $e/m_e = 1.758\,820\,17 \times 10^{11}$ C/kg
 $\hbar = 6.582\,119\,569 \times 10^{-16}$ eVs Allt är i SI-enheter, förutom energin i eV.

$$\Delta E = \frac{6.582119569 \times 10^{-16}}{2} \cdot 1.75882017 \times 10^{11} \cdot 2 \text{ eV} = 1.1577 \times 10^{-4} \text{ eV}$$

Svar:

$$\Delta E \approx 1.16 \times 10^{-4} \text{ eV} = 0.116 \text{ meV}$$

2. Rabi-oscillation (4 poäng)

Ett tvånivåsystem med dipolelement d_{01} utsätts för ett elektromagnetiskt fält med styrka \mathcal{E} under en tid. Hamiltonianen är

$$H = \hat{d} \cdot \mathbf{E} = d_{01} \mathcal{E} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Lös den tidsberoende Schrödingerekvationen för att beräkna hur lång tid t det tar för systemet att nå det exciterade tillståndet om det startar i grundtillståndet.

Schrödingerekvationen

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle.$$

Tvånivåsystem

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} c_0(t) \\ c_1(t) \end{pmatrix}.$$

Initialtillstånd

$$|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Schrödingerekvationen ger

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_0 \\ \dot{c}_1 \end{pmatrix} = d_{01}\mathcal{E} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix}.$$

Får ekvationssystem

$$\dot{c}_0 = -i\frac{d_{01}\mathcal{E}}{\hbar}c_1, \quad (1)$$

$$\dot{c}_1 = -i\frac{d_{01}\mathcal{E}}{\hbar}c_0. \quad (2)$$

Differentiera ekvation (2) en gång till:

$$\ddot{c}_1 = -i\frac{d_{01}\mathcal{E}}{\hbar}\dot{c}_0 \implies \dot{c}_0 = i\frac{\hbar}{d_{01}\mathcal{E}}\ddot{c}_1$$

Sätt in i ekvation (1):

$$i\frac{\hbar}{d_{01}\mathcal{E}}\ddot{c}_1 = -i\frac{d_{01}\mathcal{E}}{\hbar}c_1. \implies \\ \ddot{c}_1 + \mathcal{V}^2c_1 = 0$$

där $\mathcal{V} = \left(\frac{d_{01}\mathcal{E}}{\hbar}\right)$.

Mathematics handbook Beta: $y'' + ay' + by = 0$. Karakteristisk ekvation $r^2 + ar + b = 0$. Vi har $a = 0$ och $b = \mathcal{V}^2 \implies$

$$r^2 + \mathcal{V}^2 = 0 \implies r = \pm i\mathcal{V}$$

Med lösning $e^{\alpha t}C(\cos(\beta t + \theta))$ där $r = \alpha + i\beta$ så vi har $\alpha = 0$ och $\beta = \mathcal{V}$. Med initialvärde $c_1(t) = 0$ har vi

$$c_1(t) = \sin(\mathcal{V}t) \quad (3)$$

och $c_1(t) = 1$ då $\mathcal{V}t = \pi/2 \implies$

$$t = \frac{\pi}{2\mathcal{V}} = \frac{\pi\hbar}{2d_{01}\mathcal{E}}.$$

3. LS koppling (4 poäng)

Kalcium (Ca) kan befinna sig i följande elektronkonfigurationer $4s^2$, $4s4p$, $4p^2$. Dessa tillstånd beskrivs väl med spinnbankkoppling. Skriv ner alla tillstånd dessa elektronkonfigurationer kan ha enligt Russell-Saunders notation. (2p)

Antag att en Ca atom befinner sig i sitt grundtillstånd ($4s^2$). Atomen utsätts för en elektromagnetisk puls som genererar två av varandra direkt påföljande elektroniska excitationer (approximeras som

två elektroniska dipolövergångar), dvs $4s^2 \rightarrow 4s4p \rightarrow 4p^2$. Excitationerna är så snabba att ingen deexcitation hinner hända. Vilka tillstånd enligt Russell-Saunders notation förväntar vi oss att hitta atomen? (2p)

$$a) \quad 4s^2 : \left\{ \begin{array}{l} S = 1/2 - 1/2 = 0 \\ L = 0 + 0 = 0 \end{array} \right\} : {}^1S_0$$

$$4s4p : \left\{ \begin{array}{l} S = 1/2 - 1/2 = 0 \\ L = 0 + 1 = 1 \end{array} \right\} : {}^1P_1$$

$$4s4p : \left\{ \begin{array}{l} S = 1/2 + 1/2 = 1 \\ L = 0 + 1 = 1 \\ J = |L-S|, \dots, |L+S| \end{array} \right\} : {}^3P_{0,1,2}$$

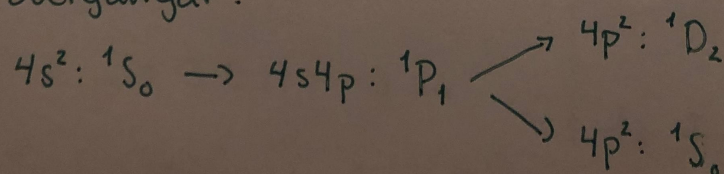
$$4p^2 : \left\{ \begin{array}{l} S = 1/2 - 1/2 = 0 \\ L = 1 - 1 = 0 \end{array} \right\} : {}^1S_0$$

$$4p^2 : \left\{ \begin{array}{l} S = 1/2 - 1/2 = 0 \\ L = 1 + 1 = 2 \end{array} \right\} : {}^1D_2$$

$$4p^2 : \left\{ \begin{array}{l} S = 1/2 + 1/2 = 1 \\ L = 0 + 1 = 1 \\ J = |L-S|, \dots, |L+S| \end{array} \right\} : {}^3P_{0,1,2} \quad \left(\begin{array}{l} \text{Notera att } L \text{ } \ddot{\text{a}}\text{r begr\"ansat} \\ \text{pga Pauli principen} \end{array} \right)$$

b) Givet elektrisk dipolövergång samt perfekt L-S koppling. gäller $\Delta J = 0, \pm 1$; $\Delta L = 0, \pm 1$
 $\Delta S = 0$.

Alltså kommer Ca ($4s^2$) genomgå följande övergångar.



4. Rotovibrationspektrum (4 poäng)

Ett absorptionspektrum av vibrationsövergången 0 - 2 i CO har den första rotation övergången i R-grenen (R1) vid $4263,65 \text{ cm}^{-1}$ och den första rotationsövergången i P-grenen (P1) vid $4256,06 \text{ cm}^{-1}$. Bestäm bindningsavståndet mellan de ingående atomerna.

$$\left. \begin{aligned} R1 &= \nu_{0 \rightarrow 2} + 2B \\ P1 &= \nu_{0 \rightarrow 0} - 2B \end{aligned} \right\} \Rightarrow B = \frac{R1 - P1}{4} \approx 1.897 \text{ cm}^{-1} \approx$$

$$\mu = \frac{m_C \cdot m_O}{m_C + m_O} = \left\{ \begin{aligned} m_C &= 12 \text{ u} \\ m_O &= 16 \text{ u} \end{aligned} \right\} = 6.86 \text{ u} \approx 1.138 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$$

Spektroskopiska enheter, med $B [1/\text{cm}] = B/hc [\text{J}]$

$$B = \frac{h}{8\pi^2 \mu r_0^2 c} \Rightarrow r_0 = \sqrt{\frac{h}{8\pi^2 \mu B c}} \approx 1.14 \pm 0.01 \text{ \AA}$$

SI = $\sqrt{\frac{h^2}{2\mu B}}$

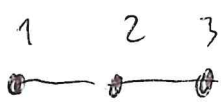
Beror på numerisk noggrannhet.

5. Hückel metoden (4 poäng)

Triatomsväte (H_3) är en ytterst instabil molekyl (livstid 10^{-6} s) men som kan bilda under speciella omständigheter.

Bestäm och visa tydligt med hjälp av Hückelmetoden (antag $\alpha = 0$, $\beta = -1$) vilken konfiguration (linjär eller cyklisk) som är mest stabil. (OBS: Hückelmetoden ger rätt svar jmf med experiment men för mer kvantitativa svar krävs mer avancerade metoder.)

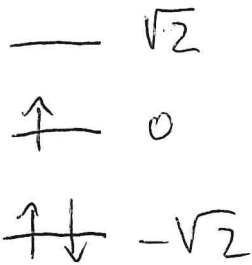
5 a)



$$H = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{cases} \beta = -1 \\ \alpha = 0 \end{cases}$$

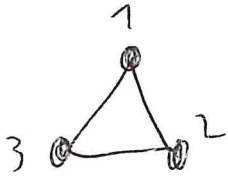
$$\det(H - \mathbb{1}\epsilon) = 0 \Rightarrow \epsilon = -\sqrt{2}, 0, \sqrt{2}$$

ϵ ~~skala~~



$$E_{\text{tot}} = 2(-\sqrt{2}) + 1 \cdot 0 = -2.83 \text{ h}\ddot{u}$$

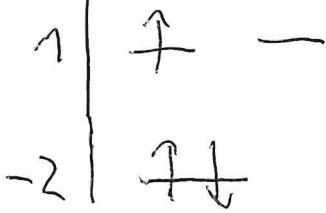
b)



$$H = \begin{pmatrix} 0 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\det(H - \mathbb{1}\epsilon) = 0 \Rightarrow \epsilon = -2, 1, 1$$

ϵ ~~skala~~



$$E_{\text{tot}} = 2(-2) + 1 \cdot 1 = -3 \text{ h}\ddot{u}$$

\Rightarrow Cykliska har lägst energi!



mest stabil

6. Deutsch algoritm (4 poäng)

Kretsen nedan beskriver Deutsch algoritm.

Vad är det för problem som löses med denna algoritm? (1 p)

Om en 1-bit-funktion f är konstant eller balanserad. Det finns fyra olika konfigurationer: Konstant betyder att output alltid är samma.

1. $f(0) = f(1) = 0$
2. $f(0) = f(1) = 1$

Balanserad är att

3. input är output: $f(i) = i$, $i = 0, 1$
4. eller flippat: $f(0) = 1$, $f(1) = 0$.

Analysera algoritmen genom att skriva ner de fyra registertillstånden $|\psi_0\rangle$, $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$ och $|\psi_3\rangle$ (2 p).

$$\begin{aligned} |\psi_0\rangle &= |0\rangle \otimes |1\rangle = |01\rangle = |0\rangle |1\rangle \\ |\psi_1\rangle &= \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2}(|00\rangle - |01\rangle + |10\rangle - |11\rangle) \\ |\psi_2\rangle &= \frac{1}{2}(|0\rangle |0 \oplus f(0)\rangle - |0\rangle |1 \oplus f(0)\rangle + |1\rangle |0 \oplus f(1)\rangle - |1\rangle |1 \oplus f(1)\rangle) \end{aligned}$$

Fall 1: $f(0) = f(1) = 0$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{2}(|00\rangle - |01\rangle + |10\rangle - |11\rangle) = \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes (|0\rangle - |1\rangle)$$

Fall 2: $f(0) = f(1) = 1$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{2}(|01\rangle - |00\rangle + |11\rangle - |10\rangle) = \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes (-|0\rangle + |1\rangle)$$

Fall 3: $f(0) = 0$, $f(1) = 1$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{2}(|00\rangle - |01\rangle + |11\rangle - |10\rangle) = \frac{1}{2}(|0\rangle - |1\rangle) \otimes (|0\rangle - |1\rangle)$$

Fall 4: $f(0) = 1$, $f(1) = 0$

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |00\rangle + |10\rangle - |11\rangle) = \frac{1}{2}(|0\rangle - |1\rangle) \otimes (-|0\rangle + |1\rangle)$$

$|\psi_3\rangle$

Fall 1: $f(0) = f(1) = 0$

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle \otimes (|0\rangle - |1\rangle)$$

Fall 2: $f(0) = f(1) = 1$

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle \otimes (-|0\rangle + |1\rangle)$$

Fall 3: $f(0) = 0, f(1) = 1$

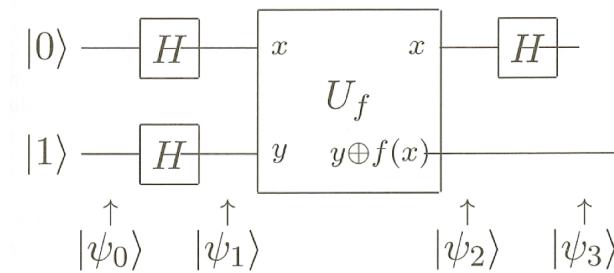
$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle \otimes (|0\rangle - |1\rangle)$$

Fall 4: $f(0) = 1, f(1) = 0$

$$|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle \otimes (-|0\rangle + |1\rangle)$$

Vad är det för mätning som skall utföras på $|\psi_3\rangle$ för att få ut svaret? (1 p)

Mäter vi qubit 1 i z-basen så ser vi att vi har fall 1 och 2 **konstant** om vi mäter 0, och fall 3 och 4 **balanserad** om vi mäter 1.



Figur 1: Deutsch algoritm.